

DAFTAR ISI

| | |
|---|-----------|
| HALAMAN JUDUL SAMPUL | i |
| HALAMAN JUDUL DUA BAHASA | ii |
| HALAMAN PENGESAHAN | iii |
| HALAMAN PERNYATAAN | iv |
| PRAKATA | v |
| DAFTAR ISI | vi |
| DAFTAR GAMBAR | xi |
| DAFTAR TABEL | xix |
| DAFTAR LAMPIRAN | xxi |
| DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN | xxii |
| INTISARI | xxiii |
| ABSTRACT | xxiv |
| | |
| BAB I. PENDAHULUAN | 1 |
| 1.1 Latar Belakang dan Permasalahan | 1 |
| 1.2 Tujuan dan Manfaat Penelitian | 8 |
| 1.2.1 Tujuan penelitian | 8 |
| 1.2.2 Manfaat penelitian | 8 |
| 1.3 Keaslian dan Kebaruan Penelitian | 8 |
| BAB II. TINJAUAN PUSTAKA | 11 |
| 2.1 Simulasi Dinamika Molekuler | 11 |
| 2.1.1 Simulasi dinamika molekuler Klasik | 11 |
| 2.1.2 Simulasi dinamika molekuler mekanika kuantum/mekanika molekuler ab initio | 12 |
| 2.1.3 Fungsi potensial 2-badan dan 3-badan | 14 |
| 2.1.4 Protokol simulasi | 16 |
| 2.2 Struktur Solvasi Logam | 16 |
| 2.3 Senyawa Kompleks Zirkonium dan Hafnium dengan Ligan Donor Nitrogen | 22 |
| 2.4 Analisis Data | 23 |
| 2.4.1 Sifat-sifat struktural | 23 |

| | | |
|---------|---|----|
| a) | Jarak kulit solvasi pertama dan kedua dengan ion | 23 |
| b) | Bilangan koordinasi dalam kulit solvasi pertama dan kedua | 24 |
| c) | Fleksibilitas dan Orientasi ligan di sekitar ion | 24 |
| 2.4.2 | Sifat-sifat dinamika | 26 |
| a) | Pertukaran molekul air dalam kulit solvasi | 26 |
| b) | Waktu tinggal ligan rata-rata (<i>Mean ligand's residence time, MRT</i>) | 26 |
| c) | Sustainabilitas proses pertukaran | 27 |
| d) | Frekuensi vibrasi ulur ion-ligan | 28 |
| 2.5 | Algoritma Simulasi Dinamika Molekuler | 28 |
| 2.5.1 | Persamaan gerak dan pengintegralan | 29 |
| 2.5.2 | Kondisi batas berkala | 30 |
| 2.5.3 | Aturan bayangan terkecil dan pemotongan potensial | 31 |
| 2.5.4 | Interaksi partikel jarak-jauh | 33 |
| 2.5.4.1 | Metode penjumlahan Ewald | 33 |
| 2.5.4.2 | Metode Medan Reaksi | 33 |
| 2.6 | Metode Medan Gaya | 34 |
| 2.6.1 | Interaksi antar atom-atom ikatan | 35 |
| 2.6.2 | Interaksi antar atom-atom non-ikatan | 36 |
| 2.7 | Kimia Kuantum | 38 |
| 2.7.1 | Persamaan Schrödinger | 38 |
| 2.7.2 | Pendekatan Born-Oppenheimer | 39 |
| 2.7.3 | Pendekatan Hartree-Fock | 40 |
| 2.7.4 | Pendekatan LCAO (<i>Linier Combination of Atomic Orbitals</i>) dan himpunan basis | 41 |
| 2.7.4.1 | Himpunan basis minimum | 41 |
| 2.7.4.2 | Fungsi gaussian terkontraksi | 42 |
| 2.7.4.3 | Himpunan basis <i>multiple-zeta</i> dan <i>split-valence</i> | 43 |
| 2.7.5 | <i>Basis Sets Superposition Error (BSSE)</i> | 44 |
| 2.7.6 | Persamaan Roothaan-Hall | 45 |

| | |
|---|----|
| BAB III. LANDASAN TEORI, HIPOTESIS DAN RANCANGAN PENELITIAN | 46 |
| 3.1 Landasan Teori | 46 |
| 3.2 Hipotesis | 51 |
| 3.2.1 Dasar pemikiran I | 51 |
| 3.2.2 Dasar pemikiran II dan III | 52 |
| 3.3 Rancangan Penelitian | 55 |
| 3.3.1 Rancangan penelitian untuk membuktikan hipotesis I | 55 |
| 3.3.1 Rancangan penelitian untuk membuktikan hipotesis II | 56 |
| 3.3.1 Rancangan penelitian untuk membuktikan hipotesis III | 56 |
| BAB IV. METODE PENELITIAN | 57 |
| 4.1 Peralatan dan Bahan Penelitian | 57 |
| 4.1.1 Piranti keras | 57 |
| 4.1.2 Piranti lunak | 57 |
| 4.1.3 Bahan yang dikaji | 58 |
| 4.2 Prosedur Kerja dan Pengumpulan Data | 58 |
| 4.2.1 Penentuan koordinat kartesian dan Z-matrix sistem M^{4+} - NH_3 dan M^{4+} - OH_2 | 59 |
| 4.2.2 Penentuan himpunan basis terbaik | 59 |
| 4.2.3 Penyusunan Potensial 2-badan dan 3-badan | 60 |
| 4.2.3.1 Penyusunan Potensial 2-badan sistem M^{4+} - H_2O dan M^{4+} - NH_3 | 61 |
| 4.2.3.2 Penyusunan Potensial 3-badan sistem H_2O - M^{4+} - H_2O | 62 |
| 4.2.3.3 Penyusunan potensial 3-badan NH_3 - M^{4+} - NH_3 dan H_2O - M^{4+} - NH_3 | 63 |
| 4.3 Kondisi Simulasi Dinamika Molekuler (DM) | 63 |
| 4.3.1 Kondisi simulasi ion M^{4+} dalam air | 63 |
| 4.3.2 Kondisi simulasi ion M^{4+} dalam amoniak cair | 64 |
| 4.3.3 Kondisi simulasi ion M^{4+} dalam campuran air-amoniak | 64 |

| | |
|--|-----|
| 4.4 Protokol Simulasi DM MK/MM | 65 |
| 4.4.1 Simulasi DM MK/MM ion M^{4+} dalam air | 65 |
| 4.4.2 Simulasi DM MK/MM ion M^{4+} dalam amoniak cair | 65 |
| 4.4.3 Simulasi DM MK/MM ion M^{4+} dalam campuran air-amoniak cair 18,6 % (persen berat) | 66 |
| 4.5 Analisis Trajektori | 66 |
| 4.5.1 Sifat-sifat struktur solvasi | 66 |
| 4.5.2 Sifat-sifat dinamika solvasi | 66 |
| BAB V. HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN | 68 |
| 5.1 Modifikasi Himpunan Basis | 68 |
| 5.2 Fungsi Potensial 2-Badan dan 3-Badan | 72 |
| 5.2.1 Fungsi potensial 2-badan ion-air dan ion-amoniak | 72 |
| 5.2.2 Fungsi potensial 3-badan air-ion-air dan amoniak-ion-amoniak | 77 |
| 5.3 Pengaruh Badan Banyak dalam Simulasi Dinamika Molekuler terhadap Jarak Ion Zr^{4+} dan Hf^{4+} dengan Ligan Air atau Amoniak | 78 |
| 5.3.1 Jarak Zr^{4+} dan Hf^{4+} dengan ligan air | 78 |
| 5.3.2 Jarak Zr^{4+} dan Hf^{4+} dengan ligan amoniak | 83 |
| 5.4 Perbedaan Rigiditas (Kekakuan) Struktur Solvasi Ion Zr^{4+} maupun Hf^{4+} dalam Air dan Amoniak | 87 |
| 5.4.1 Rigiditas struktur solvasi ion berdasarkan distribusi bilangan koordinasi | 88 |
| 5.4.2 Rigiditas struktur solvasi ion Zr^{4+} dan Hf^{4+} dalam air dan amoniak ditinjau dari pertukaran ligan antara kulit solvasi | 95 |
| 5.4.2.1 Rigiditas struktur solvasi ion Zr^{4+} dan Hf^{4+} dalam air ditinjau dari pertukaran ligan antara kulit solvasi | 95 |
| 5.4.2.2 Rigiditas struktur solvasi ion Zr^{4+} dan Hf^{4+} dalam amoniak ditinjau dari pertukaran ligan antara kulit solvasi | 98 |
| 5.4.3 Rigiditas struktur solvasi ion dalam air dan amoniak berdasarkan fungsi distribusi radial | 103 |
| 5.4.4 Rigiditas struktur solvasi ion dalam air dan amoniak berdasarkan fungsi distribusi sudut | 105 |

| | |
|---|-----|
| 5.4.5 Rigiditas struktur solvasi ion dalam air dan amoniak berdasarkan orientasi dan fleksibilitas molekul air | 107 |
| 5.5 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air dalam kulit pertama solvasi ion Zr^{4+} atau Hf^{4+} dalam Larutan Amoniak 18,6% (persen berat) | 110 |
| 5.5.1 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan fungsi distribusi radial | 110 |
| 5.5.2 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan distribusi bilangan koordinasi | 119 |
| 5.5.3 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan analisis <i>hotspot coordinate</i> dengan program Tmolex | 123 |
| 5.5.3.1 Potret struktur solvasi Zr^{4+} dalam larutan amoniak 18,6% | 124 |
| 5.5.3.2 Potret struktur solvasi Hf^{4+} dalam larutan amoniak 18,6% | 128 |
| 5.5.4 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan alur variasi jarak ion-O dan ion-N selama simulasi | 132 |
| 5.5.4.1 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan alur variasi jarak Zr^{4+} -O dan Zr^{4+} -N selama simulasi klasik MM 2-badan dan MM-2-badan + 3-badan | 132 |
| 5.5.4.2 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan alur variasi jarak Zr^{4+} -O dan Zr^{4+} -N selama simulasi DM MK/MM | 137 |
| 5.5.4.3 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan alur variasi jarak Hf^{4+} -O dan Hf^{4+} -N selama simulasi klasik MM 2-badan dan MM-2-badan + 3-badan | 139 |
| 5.5.4.4 Perbandingan jumlah ligan amoniak dan air berdasarkan alur variasi jarak Hf^{4+} -O dan Hf^{4+} -N selama simulasi DM MK/MM | 144 |
| BAB VI. KESIMPULAN DAN SARAN | 147 |
| 6.1 Kesimpulan | 147 |
| 6.2 Saran-saran | 148 |
| DAFTAR PUSTAKA | 149 |
| LAMPIRAN | 159 |